

Fecha del CVA	12/12/2023
----------------------	------------

Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre	Ana		
Apellidos	Herrero Gutiérrez		
Sexo (*)	M	Fecha de nacimiento (dd/mm/yyyy)	
DNI, NIE, pasaporte			
Dirección email	aherrero@ubu.es	URL Web	
Open Researcher and Contributor ID (ORCID) (*)	0000-0001-6126-1907		

* datos obligatorios

A.1. Situación profesional actual

Puesto	PTUN		
Fecha inicio	6/9/2002		
Organismo/ Institución	Universidad de Burgos		
Departamento/ Centro	Dpto. Química / Facultad de Ciencias		
País	España	Teléfono	947259571
Palabras clave	Diseño experimental. Optimización. Análisis de alimentos. Análisis medioambiental. Garantía de calidad. Calidad Analítica Diseñada. Validación de métodos analíticos. Regresión multivariante. Análisis multi-vía. Cromatografía líquida. Cromatografía de gases. Espectrofotometría UV-Vis. Espectrofotometría de fluorescencia molecular. ATR-FTIR.		

A.2. Situación profesional anterior (incluye interrupciones en la carrera investigadora, de acuerdo con el Art. 14. b) de la convocatoria, indicar meses totales)

Periodo	Puesto/ Institución/ País / Motivo interrupción
---------	---

A.3. Formación Académica

Grado/Master/Tesis	Universidad/Pais	Año
Licenciatura en Ciencias Químicas	Universidad de Valladolid	1991
Doctorado en Química	Universidad de Burgos	1996

Parte B. RESUMEN DEL CV:

Mi investigación se centra en la quimiometría y su aplicación a diversos campos analíticos. He participado en más de una treintena de proyectos regionales, nacionales e internacionales como miembro del grupo "Quimiometría y Cualimetría" de la Universidad de Burgos, Unidad de Investigación Consolidada (UIC 237) de Castilla y León caracterizada por su carácter claramente interdisciplinar al estar integrada por investigadores de Química Analítica y Estadística e I.O. He publicado más de 50 trabajos de investigación en revistas internacionales (1277 citas, 409 en los últimos cinco años; h-index: 22, i10-index: 38, Fuente: Google Scholar; 85,4 % de publicaciones indexadas en el JCR en revistas Q1) y he coescrito 3 capítulos en libros.

Esta investigación ha sido financiada de forma continuada por agencias regionales y nacionales mediante proyecto competitivos. En los últimos diez años, me he formado en el uso de métodos de n-vías e instrumentación acoplada en el desarrollo de métodos analíticos para sustancias farmacológicamente activas, pesticidas y migrantes, en el marco normativo de la seguridad alimentaria.

El objeto de mi investigación se ha centrado en la optimización de procedimientos analíticos utilizando la metodología del diseño experimental, DoE (cribado, superficie de respuesta, D-óptimos, diseños bloqueados ad-hoc) y técnicas de optimización multiobjetivo (función de



deseabilidad, frente Pareto con coordenadas paralelas). Cuantos más factores y niveles se consideren, mayor es el número de experimentos necesarios; esta metodología permite adaptar la experimentación de la manera más eficaz.

En este contexto, se eligió el análisis factorial paralelo (PARAFAC) para abordar los datos de n-vías debido a su capacidad para detectar y manejar solapamientos e interferencias causados por interferentes desconocidos en matrices complejas. La propiedad de unicidad de PARAFAC posibilita la identificación inequívoca de compuestos por sus perfiles cromatográficos y espectrales, como establecen algunas normativas oficiales. PARAFAC2 se ha utilizado para resolver desviaciones de la trilinealidad cuando hay ligeros desplazamientos del tiempo de retención.

El potencial de PARAFAC se ha explorado en diferentes aspectos del análisis target, como la optimización de la determinación de bisfenoles y sus diglicidiléteres que migran desde vajillas de policarbonato (C.1.10), el análisis de diclobenil y su principal metabolito en cebollas (C.1.9), o de residuos liberados de cápsulas de café (C.1.3) o de botellas de plástico (C.1.1, C.1.2). Estos análisis se realizaron por CG/MS, combinada con técnicas de extracción (SPE, dSPE, SBSE...). La combinación de DoE y métodos n-vías proporciona una herramienta realmente potente.

PARAFAC también ha resultado útil para estudiar el impacto del tiempo y la temperatura de almacenamiento en el deterioro de pez espada y la evolución de las aminas biogénicas mediante HPLC-FLD (C.1.8). Además, se detectaron rupturas de la cadena de frío mediante PLS-CM a partir de los perfiles de aminas biógenas en atún (C.1.6).

Mi investigación actual consiste en desarrollar métodos cromatográficos aplicando los principios de la AQbD en el ámbito de la garantía de calidad y la validación. Esta metodología aumenta la eficacia y reduce la carga de trabajo, al tiempo que garantiza la conformidad de los resultados. La estrategia que se está utilizando se basa en el DoE y la inversión del modelo de variables latentes; una vez definido el Perfil Analítico Objetivo (ATP), la inversión del modelo proporciona los Parámetros del Método de Control (CMP). Se ha desarrollado y utilizado un enfoque basado en modelos para identificar los CMP relacionados con la composición y el caudal de la fase móvil para la determinación con características de calidad preestablecidas de 8 triazinas en aguas superficiales mediante SPE-HPLC-DAD (C.1.4), así como, definiendo la calidad de los cromatogramas en términos de loadings de PARAFAC2, en la determinación de ftalatos por HS-SPME-GC-MS (C.1.1).

El carácter multidisciplinar del grupo confiere gran capacidad para abordar, sobre una base muy sólida, aspectos relacionados tanto con métodos instrumentales de análisis aplicados a determinaciones en matrices complejas como con la implementación y desarrollo de técnicas avanzadas de análisis de datos.

El trabajo del grupo ha repercutido en la salud de las personas y en el medio ambiente, ya que proporciona métodos analíticos fiables que permiten cumplir la normativa vigente. Además, la utilización de la metodología DoE permite reducir significativamente el coste económico, temporal y medioambiental de los estudios.

Los resultados de la investigación se difunden mediante artículos y comunicaciones a congresos, publicados en acceso abierto cuando es posible. Los preprints están disponibles en el [Repositorio Institucional](#) de la Universidad de Burgos, la cual también publica el blog [UBUINVESTIGA](#), con artículos breves sobre resultados de las investigaciones.

Parte C. LISTADO DE APORTACIONES MÁS RELEVANTES (últimos 10 años)-

C.1. Publicaciones más importantes en libros y revistas con “peer review” y conferencias (ver instrucciones).



1. L. Valverde-Som, **A. Herrero**, C. Reguera, L.A. Sarabia, M.C. Ortiz y M.S. Sánchez, Model inversion and three-way decompositions in the analytical quality by design strategy for the determination of phthalates by HS-SPME-GC-MS. *Talanta* 267 (2024) 125265. D.O.I.: [10.1016/j.talanta.2023.125265](https://doi.org/10.1016/j.talanta.2023.125265)
2. L. Valverde-Som, **A. Herrero**, C. Reguera, L.A. Sarabia y M.C. Ortiz, A new multi-factor multi-objective strategy based on a factorial presence-absence design to determine polymer additive residues by means of head space-solid phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry. *Talanta* 253 (2023) 124021. D.O.I.: [10.1016/j.talanta.2022.124021](https://doi.org/10.1016/j.talanta.2022.124021)
3. L. Valverde Som, C. Reguera, **A. Herrero**, L.A. Sarabia, M.C. Ortiz, Determination of polymer additive residues that migrate from coffee capsules by means of stir bar sorptive extraction-gas chromatography-mass spectrometry and PARAFAC decomposition. *Food Packaging and Shelf Life* 28 (2021) 100664. DOI: [10.1016/j.foodpack.2021.100664](https://doi.org/10.1016/j.foodpack.2021.100664)
4. M.C. Ortiz (CA), L.A. Sarabia, **A. Herrero** et al. (3/9), Partial Least Squares model inversion in the chromatographic determination of triazines in water, *Microchemical Journal* 164 (2021) 105971. DOI: [10.1016/j.microc.2021.105971](https://doi.org/10.1016/j.microc.2021.105971)
5. M.C. Ortiz (CA), S. Sanllorenzo, **A. Herrero** et al. (3/10), Three-way PARAFAC decomposition of chromatographic data for the unequivocal identification and quantification of compounds in a regulatory framework, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 200 (2020) 104003, DOI: [10.1016/j.chemolab.2020.104003](https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2020.104003)
6. C. Reguera, S. Sanllorenzo, **A. Herrero**, L.A. Sarabia y M.C. Ortiz, Detection of cold chain breaks using partial least squares-class modelling based on biogenic amine profiles in tuna. *Talanta*, 202 (2019) 443-451. DOI: [10.1016/j.talanta.2019.04.072](https://doi.org/10.1016/j.talanta.2019.04.072)
7. J.A. Custodio-Mendoza, A.M. Carro, M.A. Lage-Yusty, **A. Herrero**, I.M. Valente, J.A. Rodrigues y R.A. Lorenzo, Occurrence and exposure of 3-monochloropropanediol diesters in edible oils from Spanish market, *Food Chemistry*, 270 (2019) 214-222. DOI: [10.1016/j.foodchem.2018.07.100](https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2018.07.100)
8. M.C. Ortiz, S. Sanllorenzo, **A. Herrero**, C. Reguera y L.A. Sarabia, Impact of time and temperature of storage on the spoilage of swordfish and the evolution of biogenic amines through a multi-way model, *Journal of Chemometrics*, 32 (2018) e2965. DOI: [10.1002/cem.2965](https://doi.org/10.1002/cem.2965)
9. **A. Herrero**, C. Reguera, M.C. Ortiz, L.A. Sarabia y M.S. Sánchez, *Ad-Hoc* Blocked Design for the Robustness Study in the Determination of Dichlobenil and BAM in Onions by PTV-GC-MS. *Journal of Chromatography A*, 1370 (2014) 187-199. DOI: [10.1016/j.chroma.2014.10.016](https://doi.org/10.1016/j.chroma.2014.10.016)
10. M.L. Oca, M.C. Ortiz, **A. Herrero** y L.A. Sarabia, Optimization of a GC/MS Procedure that uses Parallel Factor Analysis for the Determination of Bisphenols and their Diglycidyl Ethers after Migration from Polycarbonate Tableware. *Talanta*, 106 (2013) 266–280. DOI: [10.1016/j.talanta.2012.10.086](https://doi.org/10.1016/j.talanta.2012.10.086)

C.3. Proyectos con financiación competitiva.

1. **Erasmus+ 2021-1-ES01-KA220-SCH-000024569**, STEAM in the secondary school with no barriers for blind and visually impaired pupils, Unión Europea. Coordinador: G. Casado (Colegio Aurelio Gómez Escolar, Burgos), 1/11/2021-31/10/2023, 185,426 €. (IP UBU)
2. **BU052P20**, Nuevos desarrollos metodológicos del diseño de experimentos para análisis químicos, bioquímicos y en tecnología analítica de procesos. Junta de Castilla y León. Convocatoria de subvenciones del programa de apoyo a proyectos de investigación



- cofinanciadas por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional. M.C. Ortiz (Universidad de Burgos). 1/11/2020-31/10/2023. 264,000 €. (Investigadora)
3. **Erasmus+ 2018-1-ES01-KA201-049936**, Oenoculture: Start of European enology, prefiloxeric European grapes, Unión Europea. Coordinador: G. Casado (Colegio Aurelio Gómez Escolar, Burgos), 1/9/2018-31/8/2021, 145,651 €. (IP UBU)
 4. **CTQ2017-88894-R**, Nuevas herramientas quimiométricas con variables latentes para la toma de decisiones en tecnología analítica de procesos y en contextos regulados de seguridad alimentaria. Ministerio de Economía, Industria y Competitividad. Programa Estatal De Investigación, Desarrollo e Innovación Orientada a los Retos de la Sociedad. M.C. Ortiz (Universidad de Burgos). 1/1/2018-31/7/2021. 68,970 €. (Investigadora)
 5. **BU012P17**, Herramientas quimiométricas para mejorar la toma de decisiones enmarcadas en la tecnología analítica de procesos y en seguridad alimentaria. Junta de Castilla y León. Convocatoria de subvenciones del programa de apoyo a proyectos de investigación cofinanciadas por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional. M.C. Ortiz (Universidad de Burgos). 2017-2019. 120,000 €. (Investigadora)
 6. **Erasmus+ 2016-1-ES01-KA201-024948**, Oenological Project, Unión Europea. Coordinador: G. Casado (Colegio Aurelio Gómez Escolar, Burgos), 1/9/2016-31/8/2018, 125,790 €. (IP UBU)
 7. **CTQ2014-53157-R**, Plataformas analíticas, basadas en la ventaja de segundo orden, para abordar retos en análisis regulados de contaminantes, test de migración y estudios de degradación. Ministerio de Economía y Competitividad. Programa Estatal de Investigación, Desarrollo e Innovación Orientada a los Retos de la Sociedad. M.C. Ortiz (Universidad de Burgos). 01/01/2015-30/06/2018. 101,640 €. (Investigadora)
 8. **CTQ2011-26022**, Desarrollo de métodos analíticos para residuos veterinarios, pesticidas y migrantes en alimentos de acuerdo con la normativa europea usando diseño de experimentos y PARAFAC. Ministerio de Economía y Competitividad. M.C. Ortiz (Universidad de Burgos). 2012-2014. 91,000 €. (Investigadora)
 9. **BU108A11-2**, Diseño de experimentos y calibrados de n-vías basados en PARAFAC para manejar la información proporcionada por instrumentación acoplada. Desarrollo de métodos para el análisis de residuos veterinarios, pesticidas, monómeros y aditivos en alimentos. Junta de Castilla y León. Convocatoria de subvenciones del programa de apoyo a proyectos de investigación. M.C. Ortiz (Universidad de Burgos). 01/01/2011-15/10/2013. 30,000 €. (Investigadora)

C.5. Trabajos de Fin de Máster sobre temas relacionados con el proyecto propuesto

1. Noelia Briones Rubio. Optimización de mezclas de tintas utilizando la metodología de diseño de experimentos. 11/7/2023. Máster en Química Avanzada.
2. Sara Santamaría Herrera. Validación de los métodos para la determinación de nitratos, nitritos y amonios en agua. 14/9/2022. Máster en Biotecnología y Seguridad Alimentarias.
3. Rosa María Cobo Zubia. Estudio del envejecimiento de envases plásticos mediante el uso de herramientas estadísticas. 14/09/2021. Máster en Biotecnología y Seguridad Alimentarias.
4. Alvar Martín Valdivielso. Aproximación al análisis multi-vía de plastificantes en filmes de PVC mediante ATR-FTIR y PARAFAC. 11/09/2020. Máster en Química Avanzada.
5. Adrián Torres Andrés. Métodos analíticos empleados en la gestión de agua en la ciudad de Burgos. Aplicación de herramientas estadísticas para el control de parámetros. 05/09/2018. Máster en Química Avanzada.